

Síntese, caracterização espectroscópica e determinação da estrutura cristalina e molecular do composto $[\text{Pd}(\text{bzan})(\text{dppp})(\text{SCN})]\text{CDCl}_3$.

Alessandra Stevanato¹ (PG), Antonio E. Mauro¹ (PQ), Sandra R. Ananias² (PQ), Antonio C. Moro¹ (PG), Anderson M. Santana¹ (PG)

¹Depto. de Química Geral e Inorgânica – IQ/UNESP, R. Prof. Francisco Degni s/n, CEP 14800-900, Araraquara, SP.

²Depto de Análises Clínicas – FCFAR/UNESP, R. Expedicionários do Brasil, 1621, CEP 14801-902, Araraquara, SP.

e-mail: stevanat@posgrad.iq.unesp.br

Palavras Chave: supramolécula, ciclopaladado, 1,3-bis(difenilfosfina)propano (dppp).

Introdução

Complexos ciclometalados têm despertado interesse nos últimos anos pelas suas aplicabilidades em diversas áreas, como catálise homogênea, materiais líquido-cristalino, química supramolecular e na área médica como agente antitumoral¹. No presente trabalho, sintetizou-se o composto $[\text{Pd}(\text{bzan})(\text{dppp})(\text{SCN})]$ ², bzan = N-benzilidenoanilina, dppp = 1,3-bis(difenilfosfina)propano³, que em testes iniciais apresentou potencial antitumoral. O complexo obtido pela reação entre $[\text{Pd}(\text{bzan})(\mu\text{-SCN})]_2$ e dppp na razão molar de 1:2 foi caracterizado por espectroscopia no IV, análise elementar, RMN de ¹H e ¹³C e difratometria de raios X por monocristal.

Resultados e Discussão

Os espectros de RMN e IV indicaram a presença dos ligantes dppp e bzan, sendo esta coordenada apenas via átomo de carbono. A determinação da estrutura cristalina e molecular do referido composto, **Figura 1a**, confirmou os dados de IV e de RMN. O composto cristaliza-se no sistema monoclinico, estando as principais distâncias e ângulos de ligação do complexo e as ligações de hidrogênio presentes no cristal são mostradas nas **Tabelas 1 e 2**, respectivamente

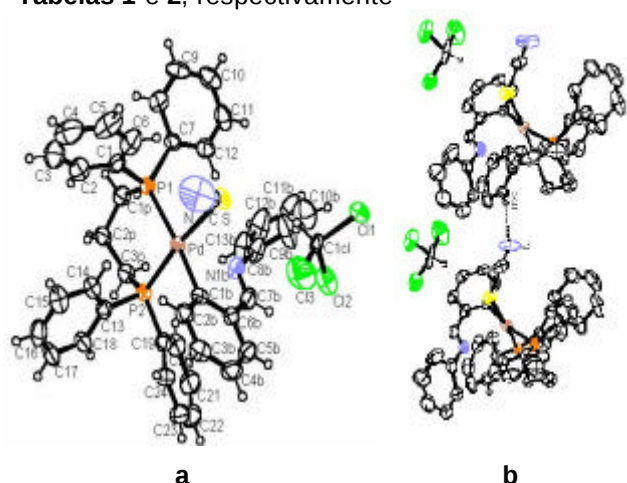


Figura 1. Representação ORTEP para **a)** $[\text{Pd}(\text{bzan})(\text{dppp})(\text{SCN})]$; **b)** ligação de hidrogênio presente no composto.

Tabela 1. Principais distâncias (Å) e ângulos (°) de ligação para $[\text{Pd}(\text{bzan})(\text{dppp})(\text{SCN})]\text{CDCl}_3$.

Pd-S	2,423(2)	S-Pd-P1	92,72(7)
Pd-P1	2,354(2)	S-Pd-P2	172,67(7)
Pd-P2	2,256(2)	S-Pd-C1b	87,31(2)
Pd-C1b	2,029(7)	P1-Pd-P2	94,45(7)
C11-C1CL	1,79(2)	P1-Pd-C1b	171,2(2)
C12-C1CL	1,77(3)	S-C-N	176,0(1)
C13-C1CL	1,68(2)	C11-C1CL-C12	108,1(9)
S-C	1,673(1)	C11-C1CL-C13	109,3(2)
N-C	1,137(1)	C12-C1CL-H	110,6(1)
C1CL-H	0,9797		

Tabela 2. Ligação de hidrogênio (Å) existente no cristal.

D-H...A	D-H (Å)	H...A (Å)	D...A (Å)	D-H...A (°)
C20—H20...N	0,9296	2,4519	3,322(15)	155,90

Um aspecto interessante é a presença de ligações de hidrogênio unindo duas unidades do composto citado anteriormente, **Figura 1b**. Além destas destacam-se as interações $\text{CH}^{\delta+}\cdots\pi$ e $\pi\cdots\pi$ existentes no cristal originando uma espécie supramolecular.

Conclusões

A estrutura cristalina e molecular do composto supra mencionado indica a presença de tiocianato terminal S-coordenado e mostra o caráter quelante da fosfina dppp. Houve a formação de uma espécie supramolecular, originada mediante ligações de hidrogênio e interações $\text{CH}^{\delta+}\cdots\pi$ e $\pi\cdots\pi$.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Fapesp, CNPq e Capes pelo suporte financeiro.

¹ E. T. Almeida; A. E. Mauro; A. M. Santana; A. V. G. Netto. *Quím. Nova*, **2005**, 28, 405.

² A. V. G. Netto; R. C. G. Frem; A. E. Mauro. *Trans. Metal. Chem.*, **2002**, 27, 279.

³ M. Ferrer; L. Rodriguez; O. Rossell. *J. Organom. Chem.*, **2003**, 681, 158.